

**Фокин А.А., Смирнов Г.Б.**

ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИРУЮЩЕГО ПАКЕТА «ELECTROLIZER» В  
ЛАБОРАТОРНОМ ПРАКТИКУМЕ ПО ДИСЦИПЛИНАМ, СВЯЗАННЫМ С  
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМИ ТЕХНОЛОГИЯМИ

*alex\_ft@mail.ru*

*ГОУ ВПО "УГТУ-УПИ имени первого Президента России*

*Б.Н.Ельцина"*

*г. Екатеринбург*

*В настоящей работе предложен программный пакет "Electrolizer", который позволяет провести лабораторную работу по моделированию физико-химической системы с распределенными параметрами - системы, поведение которой описывают дифференциальные уравнения в частных производных. Базовое решение задачи моделирования процесса роста осадка может быть основой и других лабораторных работ.*

*In this article the authors demonstrate a program application called "Electrolizer", which gives an opportunity to complete a laboratory lesson on modeling a physical-chemical system with distributed parameters, that is the system, the behavior of which is described by differential equations in partial derivatives. The base solution of the sediment growth modeling may act as a basis for other laboratory lessons.*

Лабораторные практикумы по дисциплинам, в которых рассматривают математические модели физико-химических процессов, целесообразно строить на основе моделирующих пакетов, позволяющих, с одной стороны, задавая значения различных параметров физико-химического содержания, а также значения управляющих факторов, изучать поведение этой системы в определенном факторном пространстве, а с другой стороны, совместно с содержательной частью модели возможно изучить качество моделирования в зависимости от настройки параметров численного метода, который применяется в процессе моделирования.

В настоящей работе предложен программный пакет "Electrolizer", который позволяет провести лабораторную работу по моделированию физико-химической системы с распределенными параметрами, то есть системы, поведение которой описывают дифференциальные уравнения в частных производных.

В качестве примера такой системы рассмотрен электролизер-рафинер коаксиальной симметрии. Основой его моделирования является модель в виде уравнения Лапласа с использованием граничных условий в виде постоянного напряжения на электродах (режим стабилизированного питания)  $U$ ,  $dU/dN=0$  на изоляторе (например, на границе раздела газ-электролит, на пассивированных участках анода и т.п.) [1]. Допускается также учет поляризации электрода в виде поправки  $\Delta U = \Delta U(i)$ .

Ввиду симметрии системы при решении задачи исключен азимутальный угол в цилиндрической системе координат, что существенно

ускоряет расчеты при моделировании. Особенностью моделирования процесса электролиза является тот факт, что по мере роста осадка на катоде происходит сдвиг границы, к которой стремятся некоторые граничные условия, что приводит к необходимости её коррекции во времени. В связи с этим алгоритм моделирования усложняется расчетом на каждом временном интервале прироста массы и сдвига границы.

В основу решения задачи положен метод установления [2], который позволяет в итерационном процессе рассчитывать значения потенциалов электрического поля в узлах сетки. Задание электропроводности электролита и вычисление напряженности в приэлектродном слое позволяет определить плотность тока во всех частях катода и идентифицировать его поляризацию, что в свою очередь дает возможность во внешнем итерационном процессе уточнить распределение потенциала в системе. Конечные расчетные значения плотностей токов за фиксированный интервал времени позволяют определить прирост массы катода во всех частях его поверхности при известной объемной плотности и изменение линейного размера электрода. Процесс моделирования заканчивается в зависимости от поставленного ограничения. Алгоритм моделирования приведен на рис. 1.

На основе приведенного программного пакета поставлена лабораторная работа по дисциплине «Автоматизированные системы в физико-химических технологиях». Целью работы является определение оптимальных начальных размеров катодной матрицы при заданной форме компактного анода при получении дендритного катодного осадка. В основе значений базовых параметров взяты данные, полученные в реальном технологическом процессе. Оптимизация осуществляется по критерию наибольшей производительности аппарата, в которой кроме времени процесса электролиза учтено также постоянное время транспортной операции по загрузке и выгрузке катода. Предложено решать оптимизационную задачу в полном факторном эксперименте  $4^3$  [3].

Кроме моделирования собственно технологического процесса указанный пакет также позволяет продемонстрировать влияние на конечное решение различных параметров вычислительной схемы – шаг сетки, точность определения потенциала, временной шаг.

Базовое решение задачи моделирования процесса роста осадка может быть основой и других лабораторных работ, связанных с процессами в аппаратах указанного типа.

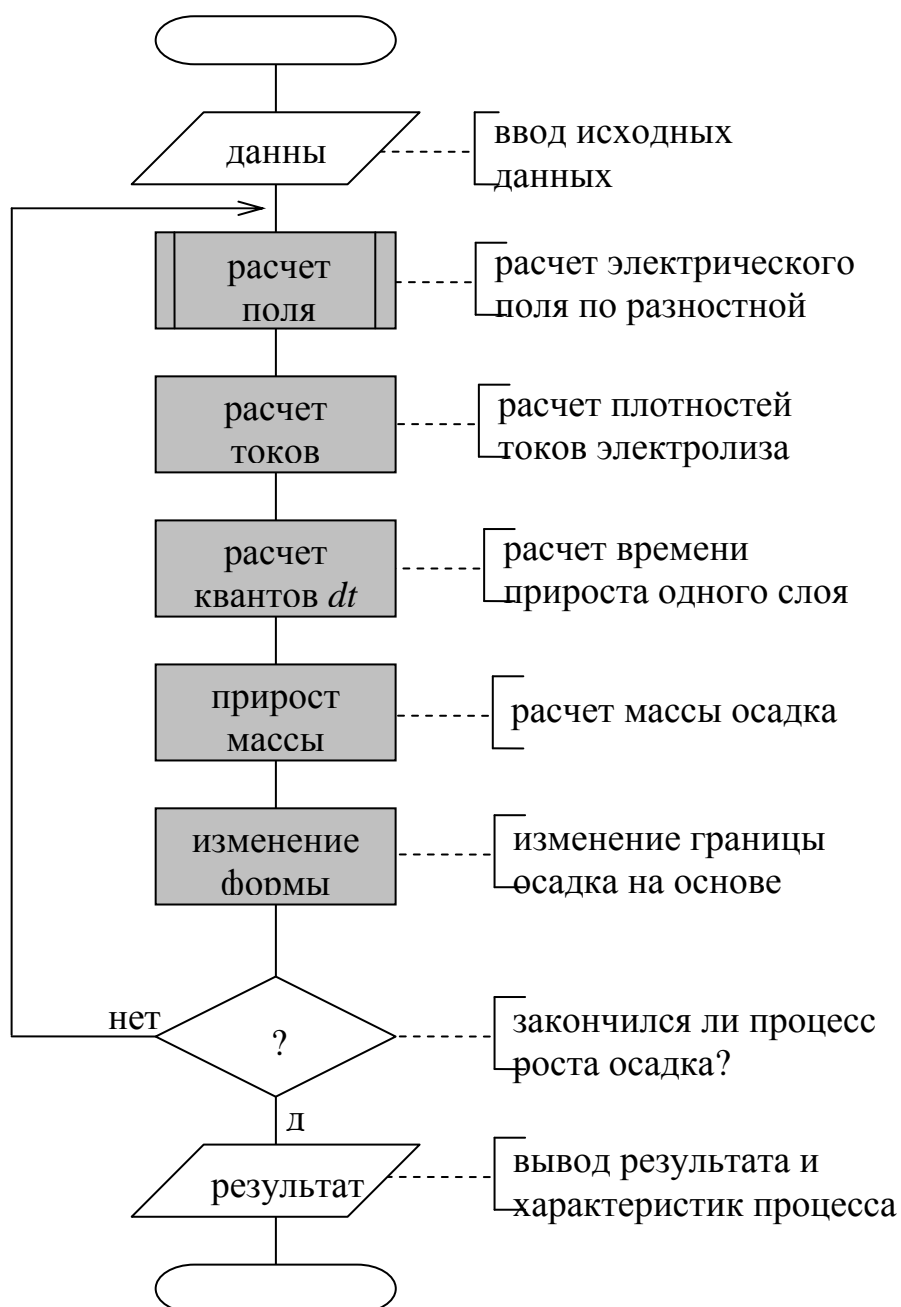


Рис.1. Алгоритм моделирования процесса роста осадка в электролизере коаксиальной симметрии

1. Н.П. Гнусин, Н.П. Поддубный, А.И. Маслий. Основы теории расчета и моделирования электрических полей в электролитах. Новосибирск: «Наука», Сибирское отделение, 1972. – 275с., ил.;
2. С.Д. Фарлоу. Уравнения с частными производными для научных работников и инженеров. М.: «Мир», 1985. – 383с., ил.
3. Ю.П. Адлер, Е.В. Маркова, Ю.В. Грановский. Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. Москва: «Наука», 1976. – 278с., ил.